

Spécialité de Master « Optique, Matière, Plasmas »

Stage de recherche (4 mois minimum, à partir de début mars 2010)

Proposition de stage pour l'année 2011-2012

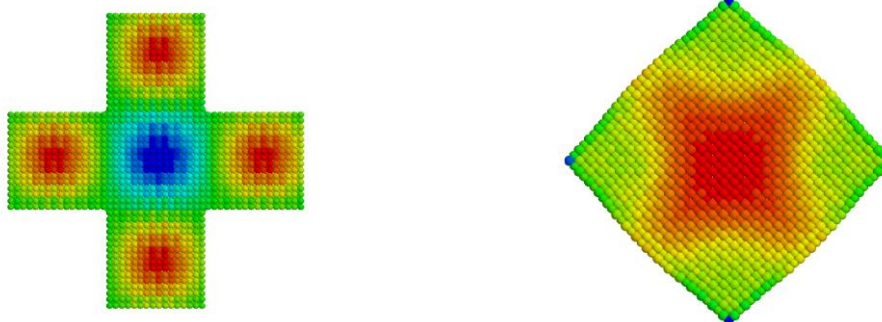
Date de la proposition : 07/10/2011

Responsable du stage / internship supervisor:	
Nom / name: Goniakowski	Prénom/ first name : Jacek
Tél : 01 44 27 46 17	Fax : 01 43 54 28 78
Courriel / mail: Jacek.Goniakowski@insp.jussieu.fr	
Nom du Laboratoire / laboratory name: Institut des NanoSciences de Paris	
Code d'identification : UMR 7588	Organisme : UPMC & CNRS
Site Internet / web site: http://www.insp.jussieu.fr/-Oxydes-en-basses-dimensions-.html	
Adresse / address: Jussieu	
Lieu du stage / internship place: Jussieu, tour 22-12, étage 5, 510	

Simulation de nanoparticules supportées d'oxydes

Les technologies modernes permettent de fabriquer des objets artificiels aux propriétés originales, encore largement inexplorées, dont l'étude constitue la base des nanosciences. Un des défis majeurs est de maîtriser l'ajustement fin de ces propriétés (forme, structure, stœchiométrie, réactivité) par un contrôle de l'environnement (ex. contrainte imposée par un substrat, pression partielle de tel ou tel gaz, pH, etc).

En relation directe avec les expériences menées dans notre équipe, nous proposons une étude par simulation numérique de la forme et de la structure atomique de petits agrégats d'oxyde, tels que MgO ou ZnO déposés sur un métal. Nous nous intéresserons surtout à l'effet des contraintes élastiques liées au désaccord de paramètres de maille entre le substrat et l'agrégat : distorsions structurales (ex. les dislocations d'interface qui produisent un effet de Moiré, visible sur la carte de pression locale à gauche) ou changements de forme (ex. stabilisation des formes « en croix », carte de pression à droite).



La simulation des effets de contraintes créées par le substrat, en fonction de la taille de l'agrégat oxyde vise à identifier les paramètres sur lesquels l'expérimentateur peut jouer pour fabriquer des objets artificiels avec une taille, une forme et une structure de son choix. L'étude va être réalisée dans le cadre d'un outil de simulation original, développé dans notre équipe.

MgO/metal interfaces at low coverage: An order N, semiempirical Hartree-Fock simulation, C. Noguera, J. Godet, J. Goniakowski, Phys. Rev. B **81**, 155409 (2010).

Ce stage pourra-t-il se prolonger en thèse ? Possibility of a PhD ? : oui

Si oui, financement de thèse envisagé/ financial support for the PhD: bourse du ministère

Lasers et matière	x	Lumière, Matière : Mesures Extrêmes	x
Optique de la science à la technologie	x	Physique des plasmas	

Fiche à transmettre (fichier pdf **obligatoirement**) sur le site <http://stages.master-omp.fr>